

Propuesta de modelización y simulación numérica con SCILAB para el aprendizaje de la dinámica continua y discontinua de los digestores biológicos y anaeróbicos

P. Hernández Melián^b, S. Brito Espino^a, C. Mendieta Pino^b, S.O. Pérez Báez^a, A. Ramos Martín^b

^a Instituto Universitario de Investigación en Estudios Ambientales y Recursos Naturales, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, 35017 Campus Universitario de Tafira. Spain.

^b Departamento de Ingeniería de Procesos, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, 35017 Campus Universitario de Tafira. Spain.

RESUMEN

En este artículo se presenta una propuesta de modelización y simulación numérica con **SCILAB**, para el aprendizaje de la dinámica continua y discontinua de los digestores biológicos anaeróbicos. Este diseño se ha realizado a partir del desarrollo del Proyecto Final de Carrera, de una estudiante de Ingeniería Industrial, que se imparte en la Escuela de Ingenierías Industriales y Civiles de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria. El objetivo de este diseño es ser utilizado en asignaturas de los Grados y Másteres Universitarios con competencias en el área de tecnología medioambiental. Además, este diseño se caracteriza principalmente por su versatilidad, a la hora de plantear diferentes situaciones, y por la utilización de herramientas libres y de código abierto. Este último aspecto resulta ser una característica importante, pues permitirá modificar el diseño, de forma rápida, en función de las necesidades futuras, por los estudiantes o por los docentes. Se muestran resultados de simulación obtenidos, según unas especificaciones de operación, y se ha observado la respuesta dinámica, tanto de la operación en régimen continuo, como en discontinuo. Demostrando estas simulaciones, que la propuesta se puede utilizar para comprender y aprender el objetivo propuesto.

Palabras clave: cinética biológica, simulación, modelo, método numérico

1. INTRODUCCIÓN

La digestión anaerobia se ha consolidado como un proceso satisfactorio para la estabilización del effluente con alta carga orgánica, y toma importancia conocer los diferentes factores que afectan al diseño de reactor biológico. Igualmente, los sistemas de tratamiento anaeróbico son sistemas biológicos que operan en ausencia de oxígeno, y son muy adecuados para el tratamiento de residuos altamente biodegradables. Por lo que resulta interesante diseñar estrategias de aprendizaje, basada en las TIC, las cuales ayuden a los estudiantes, de los grados y másteres del área con competencias en tecnologías del medio ambiente, a aprender y entender la evolución de las variables relevantes en la operación de los digestores anaeróbicos, tanto en continuo, como en discontinuo. Estas estrategias de aprendizaje podrían estar basadas en el uso de artefactos o diseños experimentales, de laboratorio, así como por implementaciones virtuales mediante la utilización de simulaciones, bajo entornos fácilmente modificables, diseñados para el estudio y análisis de las cuestiones expuestas. Siendo la propuesta educacional, relacionada con artefactos, basada en las teorías de aprendizaje psicológicas expuestas en diversos trabajos;¹⁻⁴ y la segunda propuesta basada en simulaciones, fundada en los aspectos tratados en las siguientes propuestas educacionales.⁵⁻⁹ De esta forma se pueden conseguir adecuados ambientes experimentales en línea con la aproximación constructivista, para aprender a través de técnicas activas.^{1, 10}

El principal objetivo de este artículo es una propuesta de modelización y simulación numérica con **SCILAB**, para el aprendizaje de la dinámica continua y discontinua de los digestores biológicos anaeróbicos.

email: alejandro.ramos@ulpgc.es

2. FUNDAMENTOS DE LA MODELIZACIÓN DE PROCESOS BIOLÓGICOS

Las bacterias y, en menor grado, los hongos, son responsables de las reacciones de biodegradación que utilizamos en el biotratamiento.¹⁴ Aunque la mayoría de las reacciones de degradación forman parte del metabolismo normal de estas células, el objetivo del metabolismo de los microorganismos no es la eliminación de los contaminantes ambientales, sino el crecer y mantenerse. Por lo tanto, la formulación de los modelos debe comenzar por la biomasa activa y por los factores que permitan este crecimiento y mantenimiento.

Un proceso biológico de tratamiento o depuración de aguas residuales es un sistema en el cual se debe mantener un cultivo de microorganismos (biomasa) que se alimenta de las impurezas del agua residual (sustrato o alimento). Los microorganismos crecen y se alimentan extrayendo los nutrientes, electrones y energía del ambiente. Estas impurezas, nutrientes, son la materia orgánica biodegradable, el amonio, el nitrato, el fosfato y otros contaminantes a menor concentración y conforman la base de los constituyentes celulares: carbohidratos, aminoácidos, lípidos y ácidos nucleicos. Los electrones son necesarios para reducir los nutrientes a la forma química utilizada por los constituyentes celulares y para generar la energía necesaria que posibilite la síntesis y el mantenimiento de la biomasa. El proceso más básico del metabolismo microbiano es la transferencia de electrones desde un sustrato donante hasta un sustrato receptor.

El lugar donde se ponen en contacto la biomasa con el agua residual para llevar a cabo el tratamiento se denomina reactor o digestor biológico o lo que es lo mismo biorreactor o biodigestor y pueden ser de diferentes tipos, como se verá en un capítulo posterior.

2.1 Componentes básicos de un modelo

En el modelo matemático más simple, se requieren al menos dos componentes para describir lo que ocurre en un digestor. Estos componentes son:

- Sustrato (S): componente del agua residual que sirve de alimento a la biomasa. En un proceso heterótrofo, su concentración podría medirse a través de la demanda bioquímica de oxígeno DBO_5 o mediante la demanda química de oxígeno DQO . De hecho, este modelo considera que sólo la materia orgánica soluble es biodegradable y puede ser atacada por la biomasa, por lo que S es un componente soluble. El sustrato, por tanto, no se separa por sedimentación.
- Biomasa (X): cultivo de microorganismos que se alimentan de la materia orgánica biodegradable del agua residual. Su concentración se puede medir mediante la concentración de sólidos suspendidos volátiles (SSV) en el digestor biológico. La biomasa está formada por partículas y puede separarse por sedimentación, filtración o flotación.

2.2 Procesos cinéticos básicos

Un modelo básico de dos componentes, como el mencionado arriba, tiene como mínimo dos procesos básicos:

- Crecimiento de la biomasa: este proceso es responsable del consumo del sustrato y del crecimiento de la biomasa.
- Muerte de la biomasa: este proceso implica una mengua en el crecimiento de la biomasa obtenida en el proceso anterior

2.3 Modelo básico de un sistema microbiológico

Supongamos que el crecimiento, a expensas de un único sustrato S , de la biomasa de microorganismos X en un digestor perfectamente mezclado viene representado por la reacción:



donde S es el sustrato limitante del crecimiento microbiano y X la biomasa activa. La velocidad de utilización de crecimiento de la biomasa se expresaría como:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X \quad (2)$$

tratándose de un proceso de primer orden, mientras que la velocidad de consumo de sustrato vendría dada por:

$$\frac{dS}{dt} = -kS \quad (3)$$

siendo k la velocidad específica de consumo de sustrato (s^{-1}) y μ la velocidad específica de crecimiento microbiano (s^{-1}). Con ello obtenemos un sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \mu X \\ \frac{dS}{dt} = -kS \end{cases} \quad (4)$$

dicho sistema constituye la representación matemática del sistema considerado. Si expresamos ambos procesos (crecimiento de la biomasa y consumo de sustrato) en función de la velocidad de crecimiento de la biomasa, el sistema (4) se transformará en:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \mu X \\ \frac{dS}{dt} = -\alpha_S \mu X \end{cases} \quad (5)$$

siendo α_S un coeficiente estequiométrico para la variable de estado S . Los coeficientes estequiométricos proporcionan el valor del factor de conversión entre la velocidad del proceso y la velocidad de variación, inducida por aquel, en cada variable de estado.

Es importante destacar que la biomasa de microorganismos juega el papel de autocatalizador, ya que se produce en el proceso, pero es necesaria su presencia para que se produzca la biotransformación del sustrato.

Las experiencias de crecimiento de microorganismos muestran que la velocidad de crecimiento varía con el tiempo y está influenciada por muchos factores ambientales físico-químicos y biológicos como: concentración de sustratos (S), concentración de biomasa (X), concentración de productos (P), pH, temperatura (T), concentración de oxígeno disuelto, intensidad luminosa y varios inhibidores del crecimiento microbiano.¹⁵

La velocidad específica de crecimiento de los microorganismos es generalmente expresada como productos de términos individuales cada uno de los cuales se refiere a un factor limitante del crecimiento:

$$\mu(t) = \mu_{max} \times f_s(S) \times f_x(X) \times f_P(P) \times f_{O_2}(O_2) \times f_{pH}(pH) \times f_T(T)..... \quad (6)$$

donde μ_{max} es la velocidad específica máxima de crecimiento microbiano (s^{-1}).

En cuanto al tipo de cinética empleada, es bastante frecuente utilizar el modelo de Monod (7) para los procesos catalizados por enzimas, con lo que:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \quad (7)$$

siendo K_s la constante de semisaturación para el sustrato S . Según este modelo, la velocidad de un proceso biológico de crecimiento microbiano tenderá asintóticamente al valor máximo μ_{max} , y la concentración a la cual la velocidad del proceso es igual a la mitad de la velocidad máxima será el valor de la constante de semisaturación del proceso K_s .

Se debe aclarar que todos los procesos biológicos que se exponen en este artículo se desarrollan en el interior de un digestor, con lo que se pueden utilizar las ecuaciones cinéticas dadas, para así conseguir el modelo matemático básico, suponiendo: que el digestor está perfectamente mezclado; que la velocidad de crecimiento microbiano está únicamente afectada por la concentración de sustrato disponible; que opera en un proceso de merma de la biomasa activa, de velocidad ρ_d directamente proporcional al valor de esta última:

$$\rho_d = -k_d X \quad (8)$$

que al sistema (digestor) entra una corriente con concentración de sustrato S_{in} de razón de dilución D . La razón de dilución representa el caudal volumétrico del afluente por unidad de volumen del digestor. $D = \frac{Q}{V}$, donde V es el volumen del digestor (L^3) y Q el caudal volumétrico del afluente ($L^3 s^{-1}$); que del digestor sale una corriente de razón de dilución D , con concentración de sustrato S y concentración de microorganismos X .

La aplicación en el digestor de balances de materia para el sustrato y la concentración de biomasa, nos proporcionaría el modelo matemático que representa la evolución en el tiempo de estos dos componentes en el digestor y que estaría formado por el sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = (\mu - D - k_d) X = \left(\mu_{max} \frac{S}{K_s + S} - D - k_d \right) X \\ \frac{dS}{dt} = D(S_{in} - S) - \beta_s \mu X = D(S_{in} - S) - \beta_s \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} X \end{cases} \quad (9)$$

siendo éste, el modelo más básico, al que se puede hacer frente.

2.4 Régimen estacionario del modelo básico

Para obtener el estado estacionario del sistema se debe considerar el sistema de ecuaciones diferencial (9) y forzar que las derivadas sean cero, lo que implica que se haya alcanzado tal régimen.

$$\begin{cases} 0 = \left(\mu_{max} \frac{S_{re}}{K_s + S_{re}} - D - k_d \right) X_{re} \rightarrow S_{re} = \frac{(D + k_d)K_s}{(\mu_{max} - (D + k_d))} \rightarrow S_{re} = f(D) \\ 0 = D(S_{in} - S_{re}) - \beta_s \mu_{max} \frac{S_{re}}{K_s + S_{re}} X_{re} \rightarrow X_{re} = \frac{D(S_{in} - S_{re})}{\mu_{max} \frac{S_{re}}{K_s + S_{re}}} \rightarrow X_{re} = f(D, S_{in}) \end{cases} \quad (10)$$

Tal y como se observa en (10) el estado estacionario depende de las propiedades biológicas (k_d , K_s , μ_{max}), de la dilución D y de la concentración de entrada del sustrato S_{in} . Además, se tienen que cumplir las siguientes condiciones, para obtener una solución real:

$$\begin{aligned} \mu_{max} &> k_d \\ D &< \mu_{max} - k_d \end{aligned} \quad (11)$$

Estas condiciones son necesarias, pues si la tasa de crecimiento máxima μ_{max} no fuera superior a la merma de la biomasa, no existiría una población estable, ni digestión anaeróbica. Algo similar ocurre con la dilución que debe de ser inferior a la concentración de la población biológica activa, por lo que la dilución ideal máxima será $D_{max} = \mu_{max} - k_d$.

3. MODELO BÁSICO CON ENTRADA TIPO IMPULSO

La operación del digestor con una entrada en continuo es la descrita anteriormente, pero la carga de sustrato en forma discontinuo requiere una serie de modificaciones en el modelo,¹⁶ para tenerlo en cuenta. En esta sección se mostrará el planteamiento del modelo para un tipo de carga o entrada a impulsos, hecho que resulta correcto, pues la carga supone la introducción de un volumen determinado V_1 , con una carga orgánica, en muy poco tiempo. Esta carga se repetirá cada intervalo de tiempo T , bastante mayor al tiempo de carga, que a todos los efectos tiende a ser cero el tiempo de carga frente a T . El volumen V_1 , de la carga, cada vez que es introducido desplaza una cantidad de volumen igual a V_1 , siendo el volumen total del digestor V_T , y volumen no desplazado es V_2 , por lo que se tiene que $V_T = V_1 + V_2$. Una vez que se realiza la carga, el volumen de líquido con la materia orgánica se supone perfectamente mezclado, en el mismo instante de la carga. Como consecuencia de lo anterior, la dilución pasa a tener la siguiente expresión:

$$D = \frac{\hat{Q}}{V_1 + V_2} = \frac{\frac{V_1}{T}}{V_1 + V_2} = \frac{V_1}{V_T} \quad (12)$$

donde se observa que el caudal $\hat{Q}$ resulta ser en realidad un "pseudo-caudal", pues resulta ser una especie de caudal promedio en el periodo T , entre carga y carga de sustrato.

De todo lo expuesto, en relación a la entrada tipo impulso, se puede adaptar el modelo básico (9), tal y como aparece en (13):

$$\left. \begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= (\mu - k_d) X \\ \frac{dS}{dt} &= -\beta_s \mu X \end{aligned} \right\} \iff t \neq nT$$

$$\left. \begin{aligned} \Delta S &= \frac{V_1}{V_T} (S_{in} - S^*(nT)) \\ \Delta X &= 0 \end{aligned} \right\} \iff t = nT \quad (13)$$

siendo $S^*(nT)$, en la ecuación (13), la concentración del sustrato justo antes de la carga. Quedando la concentración $S(nT)$ tras la carga y el mezclado;

$$S(nT) = \frac{S_{in} V_1 + S^*(nT) V_2}{V_T} \quad (14)$$

quedando ésta en función de la concentración de entrada, de la existente en el digestor, y de sus respectivos volúmenes.

4. APROXIMACIÓN NUMÉRICA DEL MODELO BÁSICO

Debido a que el sistema de ecuaciones (9) y (13) muestran unas relaciones no lineales en las variables de estado, resulta necesario la aplicación de una aproximación numérica del problema para la resolución del mismo. Este último supone aplicar los procedimientos típicos de los problemas de valor inicial. En este artículo se propone utilizar un método denominado predictor-corrector, que se fundamenta en la utilización de una solución explícita, como solución inicial predictora, y luego a partir de ésta, se utilizará una solución implícita iterativamente hasta lograr la convergencia de la solución, con una tolerancia. Las soluciones utilizadas son: para el predictor la forma más simple de Euler, en su forma explícita, tal y como se muestra a continuación;

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0 \Rightarrow y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n), \quad t_n = t_0 + nh \quad (15)$$

y para el corrector la solución implícita de Crank-Nicolson, o también equivalente a una solución trapezoidal. Esta solución se muestra a continuación:

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0 \Rightarrow y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})], \quad t_n = t_0 + nh \quad (16)$$

Unificando las dos soluciones en el proceso de predicción-corrección queda:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(P)} &= y_n + hf(t_n, y_n) \Leftarrow \text{Predicción} \\ y_{n+1}^{(C_0)} &= y_n + \frac{h}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1}^{(P)})] \Leftarrow \text{Arranque del método con el predictor.} \\ y_{n+1}^{(C_{k+1})} &= y_n + \frac{h}{2} [f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1}^{(C_k)})] \Leftarrow \text{Corrección, hasta que } |y_{n+1}^{(C_{k+1})} - y_{n+1}^{(C_k)}| < \epsilon \end{aligned} \quad (17)$$

tal y como se indica este proceso iterativo seguirá hasta cumplir con las especificaciones de convergencia.

5. RESULTADOS

En esta sección se muestran resultados obtenidos, a partir de la propuesta de modelización y simulación con **SCILAB**. Se ha planteado tres simulaciones con la misma dilución $D = 0.05s^{-1}$, con una concentración de la carga orgánica de entrada de $S_{in} = 130g/m^3$, y un volumen total de $V_T = 4m^3$.

En la fig 1 se muestra la primera simulación con dinámica en continuo, tanto la evolución del sustrato, como la de la biomasa, tal y como se observa el sistema parte de un estado inicial, y tras el proceso transitorio alcanza el estado estacionario, con los siguientes valores $S_{re} = 61.6g/m^3$ y $X_{re} = 69.7g/m^3$.

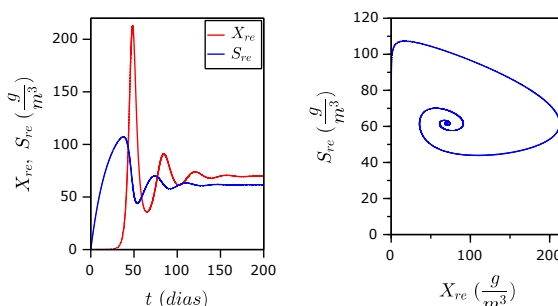


Figura 1. Resultado con $S_{re} = 61.6g/m^3$ y $X_{re} = 69.7g/m^3$, y régimen en continuo.

En la fig 2 se muestra la segunda simulación con dinámica en discontinuo con periodo $T = 0.5h$, tanto la evolución del sustrato, como la de la biomasa, tal y como se observa el sistema parte de un estado inicial, y tras el proceso transitorio alcanza el estado estacionario, con los siguientes valores $S_{re} = 61.6g/m^3$ y $X_{re} = 69.7g/m^3$.

En la fig 3 se muestra la tercera simulación con dinámica en discontinuo con periodo $T = 2.5h$, tanto la evolución del sustrato, como la de la biomasa, tal y como se observa el sistema parte de un estado inicial, y tras el proceso transitorio alcanza el estado estacionario, con los siguientes valores $S_{re} = 61.6g/m^3$ y $X_{re} = 69.7g/m^3$.

En la fig 4 se muestran juntas, para poder compararlas, la primera y tercera simulaciones. En ella se observa que en los dos casos el estado de régimen estacionario coincide, tal y como era de esperar.

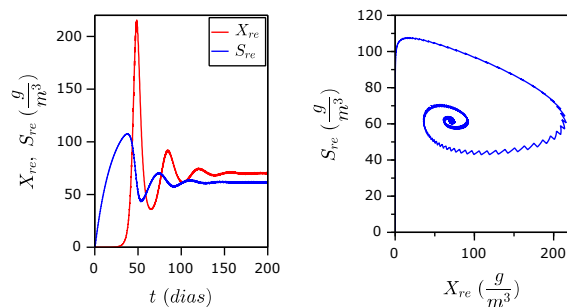


Figura 2. Resultado $S_{re} = 61.6\text{g/m}^3$ y $X_{re} = 69.7\text{g/m}^3$, y regimen en discontinuo con $T = 0.5h$.

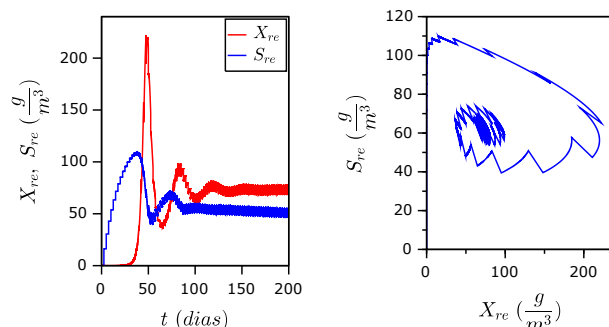


Figura 3. Resultado $S_{re} = 61.6\text{g/m}^3$ y $X_{re} = 69.7\text{g/m}^3$, y regimen en discontinuo con $T = 2.5h$.

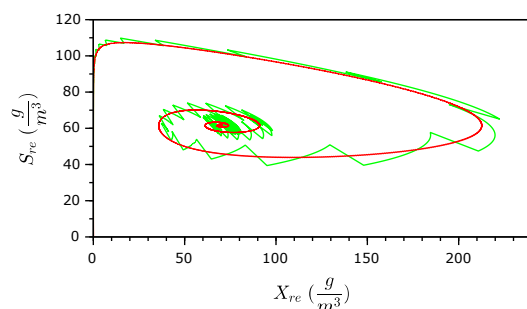


Figura 4. Resultados de la simulación primera y tercera

6. CONCLUSIONES

En este artículo se presenta una propuesta de modelización y simulación numérica con **SCILAB**, para el aprendizaje de la dinámica continua y discontinua de los digestores biológicos anaeróbicos. Además, este diseño está basado en la utilización de una aplicación informática de código abierto. Esta característica hace que los estudiantes puedan modificar fácilmente el diseño presentado. Se han implementado una serie de ensayos, para probar la viabilidad técnica y pedagógica de la propuesta. De los resultados experimentales obtenidos, de los ensayos realizados, se comprueba que es viable la propuesta de aprendizaje presentada en este artículo. Finalmente, es posible indicar que el diseño experimental propuesto tiene una gran flexibilidad y versatilidad, gracias a la utilización de aplicaciones gratuitos, a su fácil utilización, y a la gran comunidad que trabaja en el desarrollo de nuevas herramientas de cálculo dentro del amparo de **SCILAB**.

REFERENCIAS

- [1] Mekic, E., Djokic, I., Zejnelagic, S., and Matovic, A., "Constructive approach in teaching of voip in line with good laboratory and manufacturing practice," *Computer Applications in Engineering Education*, n/a-n/a (2015).

- [2] Garcia, I. and Cano, E. M., “Designing and implementing a constructionist approach for improving the teaching-learning process in the embedded systems and wireless communications areas,” *Computer Applications in Engineering Education* **22**(3), 481–493 (2014).
- [3] Cano, E. M., Ruiz, J. G., and Garcia, I. A., “Integrating a learning constructionist environment and the instructional design approach into the definition of a basic course for embedded systems design,” *Computer Applications in Engineering Education* **23**(1), 36–53 (2015).
- [4] Sorathia, K. and Servidio, R., “Learning and experience: Teaching tangible interaction and edutainment,” *Procedia - Social and Behavioral Sciences* **64**, 265 – 274 (2012). 12 th International Educational Technology Conference - {IETC} 2012.
- [5] [*Simulation and learning. A model-centered approach*], Springer (2013).
- [6] Deshpande, A. A. and Huang, S. H., “Simulation games in engineering education: A state-of-the-art review,” *Computer Applications in Engineering Education* **19**(3), 399–410 (2011).
- [7] Uribe, M. d. R., Magana, A. J., Bahk, J.-H., and Shakouri, A., “Computational simulations as virtual laboratories for online engineering education: A case study in the field of thermoelectricity,” *Computer Applications in Engineering Education* **24**(3), 428–442 (2016).
- [8] Lee, W.-P. and Hwan, C.-L., “A computer simulation in mechanics teaching and learning: A case study in circular motions,” *Computer Applications in Engineering Education* **23**(6), 865–871 (2015).
- [9] Datta, A. K., Rakesh, V., and Way, D. G., “Simulation as an integrator in an undergraduate biological engineering curriculum,” *Computer Applications in Engineering Education* **21**(4), 717–727 (2013).
- [10] Smith, R. C., Iversen, O. S., and Hjorth, M., “Design thinking for digital fabrication in education,” *International Journal of Child-Computer Interaction* **5**, 20 – 28 (2015). Digital Fabrication in Education.
- [11] Corbellini, S. and Vallan, A., “Arduino-based portable system for bioelectrical impedance measurement,” in [*Medical Measurements and Applications (MeMeA), 2014 IEEE International Symposium on*], 1–5 (June 2014).
- [12] Pawar, P. A., “Heart rate monitoring system using ir base sensor amp; arduino uno,” in [*IT in Business, Industry and Government (CSIBIG), 2014 Conference on*], 1–3 (March 2014).
- [13] Gandra, M., Seabra, R., and Lima, F. P., “A low-cost, versatile data logging system for ecological applications,” *Limnology and Oceanography: Methods* **13**(3), 115–126 (2015). e10012.
- [14] Gealt, M. A., Morris, A., et al., [*Biotratamiento de residuos tóxicos y peligrosos*], McGraw-Hill Interamericana (2012).
- [15] Colomer, F. L., “Metabolismo bacteriano y modelización matemática de procesos,”
- [16] Wei, C. and Chen, L., “Dynamic analysis of mathematical model of ethanol fermentation with gas stripping,” *Nonlinear Dynamics* **57**(1), 13–23 (2009).